TITLE:

前処理付きGMRES法による最小二乗問題の解法 (21世紀における数値解析の新展開)

AUTHOR(S):

速水, 謙; 伊藤, 徳史

CITATION:

速水, 謙 ...[et al]. 前処理付きGMRES法による最小二乗問題の解法 (21世紀における数値解析の新展開). 数理解析研究所講究録 2005, 1441: 114-128

ISSUE DATE:

2005-07

URL:

http://hdl.handle.net/2433/47552

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

数理解析研究所講究録 1441 巻 2005 年 114-128

前処理付きGMRES法による最小二乗問題の解法

国立情報学研究所　速水　謙 (Ken Hayami) [1]
National Institute of Informatics
(株) ビジネスデザイン研究所　伊藤 徳史 (Tokushi Ito)
Business Design Laboratory Co., Ltd.

1　はじめに

最小二乗問題

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2 \tag{1}$$

を考える. ただし, A は大規模で疎な $m \times n\,(m \geq n)$ の実行列とする. 式 (1) は正規方程式

$$A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x} = A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \tag{2}$$

と等価である.

2　直接法

上記の問題に対する従来法としては, まず直接法がある. 代表的な方法としては, まず A を, $m \times n$ の直交行列 $Q\,(Q^{\mathrm{T}}Q = \mathrm{I}_n)$ と, $n \times n$ の上三角行列 R の積に $A = QR$ と分解する. 具体的には, Householder 法, 修正 Gram-Schmidt 法, Givens 法などを用いる. すると, (2) 式は $R^{\mathrm{T}}R\boldsymbol{x} = R^{\mathrm{T}}Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ と等価である. また, $\mathrm{rank}A = n$ なら R は正則だから, $R\boldsymbol{x} = Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ から後退代入により, 式 (1) の最小二乗解 $\boldsymbol{x}$ を求める.

ただし, 大規模疎な問題では, メモリーと計算時間を節約する工夫 [1] が必要となる.

3　正規方程式を用いた反復法

大規模疎な問題に対しては, メモリーと計算時間の節約のため反復法が有効となる. 正規方程式 (2) の係数行列 $A^{\mathrm{T}}A$ は対称な正方行列であり, $\mathrm{rank}A = n$ なら定値なので,

[1] 総合研究大学院大学・複合科学研究科 併任 (also at the School of Multidisciplinary Sciences, the Graduate University for Advanced Studies)

正規方程式に共役勾配法を適用する下記の Conjugate Gradient Least Squares (CGLS) 法が従来主流の方法である.

CGLS 法

Choose $\boldsymbol{x}_0$.
$\tilde{\boldsymbol{r}}_0 = A^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0)$
$\boldsymbol{p}_0 = \tilde{\boldsymbol{r}}_0$
for $i = 0, 1, 2, \ldots$ until convergence
  $\alpha_i = \dfrac{(\tilde{\boldsymbol{r}}_i, \tilde{\boldsymbol{r}}_i)}{(\boldsymbol{p}_i, A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{p}_i)}$
  $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \alpha_i A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{p}_i$
  $\tilde{\boldsymbol{r}}_{i+1} = \tilde{\boldsymbol{r}}_i - \alpha_i A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{p}_i$
  $\beta_i = \dfrac{(\tilde{\boldsymbol{r}}_i, \tilde{\boldsymbol{r}}_i)}{(\tilde{\boldsymbol{r}}_{i-1}, \tilde{\boldsymbol{r}}_{i-1})}$
  $\boldsymbol{p}_{i+1} = \tilde{\boldsymbol{r}}_{i+1} + \beta_i\boldsymbol{p}_i$
end

しかしながら, $A^{\mathrm{T}}A$ の条件数は A の条件数の二乗なので, 悪条件問題に対しては CGLS 法そのものの収束は遅い. 従って, 悪条件問題に対しては適切な前処理が必要となる. 簡便な前処理法としては, $A^{\mathrm{T}}A$ の対角項を用いたスケーリングがある. その他に, 例えば不完全コレスキー分解 [14], 不完全 QR 分解 [13, 15], 不完全 Givens 直交化 [2], ロバストな不完全分解 [3] などの手法が提案されている.

例えば不完全 QR 分解の例として Jennings らによる下記の不完全修正 Gram-Schmidt (IMGS) 法 [13] がある. ただし, $A = [\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n]$, $\boldsymbol{a}_i^{(1)} = \boldsymbol{a}_i \ (i = 1, \ldots, n), \tau$ を閾値パラメタとする.

for $i = 1, 2, \ldots, n$
  $r_{ii} = ||\boldsymbol{a}_i^{(i)}||_2, \qquad \boldsymbol{q}_i = \dfrac{\boldsymbol{a}_i^{(i)}}{r_{ii}}$
  for $j = i + 1, \ldots, n$
    $r_{ij} = \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_j^{(i)}$
    if $|r_{ij}| < \tau||\boldsymbol{a}_i||_2$ then $r_{ij} = 0$
    $\boldsymbol{a}_j^{(i+1)} = \boldsymbol{a}_j^{(i)} - r_{ij}\boldsymbol{q}_i$
  end
end

また, Saad は下記のような不完全修正 Gram-Schmidt(IMGS) 法 [15] を提案している. ただし, p_Q, p_R をパラメタとする.

for $i = 1, 2, \ldots, n$

  $r_{ii} = ||\boldsymbol{a}_i^{(i)}||_2, \qquad \boldsymbol{q}_i = \dfrac{\boldsymbol{a}_i^{(i)}}{r_{ii}}$

  Determine the p_Q largest elements of $\boldsymbol{q}_i$ and assign 0 to the other elements.

  for $j = i+1, \ldots, n$

    $r_{ij} = \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_j^{(i)}$

    Determine the p_R largest r_{ij}'s for $i+1 \le j \le n$ and assign 0 to the others.

    $\boldsymbol{a}_j^{(i+1)} = \boldsymbol{a}_j^{(i)} - r_{ij}\boldsymbol{q}_i$

  end

end

このようにして得られた上三角行列 $R = (r_{ij})$ を用いて正規方程式 (2) を

$$\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{x}} = \tilde{\boldsymbol{b}}, \tag{3}$$

ただし,

$$\tilde{A} = R^{-\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A R^{-1}, \quad \tilde{\boldsymbol{x}} = R\boldsymbol{x}, \quad \tilde{\boldsymbol{b}} = R^{-\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b},$$

と前処理し, 式 (3) に CGLS 法を適用する.

4 正規方程式に基づかない反復法

前処理をしたとしても, 式 (3) の条件数は AR^{-1} の条件数の二乗なので悪条件問題に対しては収束がまだ十分速くない可能性がある. これに対して, Zhang らは正規方程式に基づかないで, A を直接扱う反復法として, $n \times m$ の写像行列 B を用いて行列 AB を係数行列とする系に対して Orthomin(k) 法を適用する CR-LS(k) 法を提案している [17, 18, 19].

本論文では, Orthomin(k) 法よりも破綻しにくい GMRES 法に同様の考えを適用することから始める [7, 8, 9, 10, 11, 12].

5 GMRES 法による最小二乗問題の解法

GMRES 法 (Generalized Minimal Residual method)[16] は, 対称とは限らない正則な行列を係数行列とする連立一次方程式のロバストな Krylov 部分空間法として知られる. そのままだと, 反復数の増加に伴いメモリーと計算量が膨大になるので, 下記のように k 反復毎にそのときの近似解を初期解としてアルゴリズムを再開する (リスタートする)GMRES(k) 法を使うことが多い. ($k = \infty$ としたのが GMRES 法に相当する.)

GMRES(k) 法

Choose $\boldsymbol{x}_0$.

* $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$

$$\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}_0}{||\boldsymbol{r}_0||_2}$$

for $i = 1, 2, \ldots, k$ until convergence

$$h_{j,i} = (A\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j) \quad (j = 1, 2, \ldots, i)$$

$$\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1} = A\boldsymbol{v}_i - \sum_{j=1}^{i} h_{j,i}\boldsymbol{v}_j$$

$$h_{i+1,i} = ||\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}||_2$$

$$\boldsymbol{v}_{i+1} = \frac{\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}}{h_{i+1,i}}$$

Find $\boldsymbol{y}_i \in \mathbf{R}^i$ which minimizes $||\boldsymbol{r}_i||_2 = ||\ ||\boldsymbol{r}_0||_2\, \boldsymbol{e}_i - \bar{H}_i\, \boldsymbol{y}\, ||_2$.

end

$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k]\boldsymbol{y}_k$

$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_k$

Go to $*$.

ただし, 上記で $\bar{H}_i = (h_{pq}) \in \mathbf{R}^{(i+1)\times i}$, $\boldsymbol{e}_i = (1, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^{i+1}$ とする.

上記で $h_{i+1,i} = 0$ となるとき, アルゴリズムが破綻するという. 丸め誤差がなければ, $A \in \mathbf{R}^{N\times N}$ が正則な場合は GMRES 法は破綻することなく N 反復内に連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の真の解を与える [16].

GMRES 法を直接式 (1) の最小二乗問題に適用しようとしても, A は $m \times n$ 行列で, 初期近似解 $\boldsymbol{x}_0$ に対する残差ベクトル $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$ は m 次元ベクトルなので, $\boldsymbol{r}_0$ に A をかけて Krylov 部分空間を構成することはできない. そこで, $n \times m$ 行列 B を使ってこの問題を解決するには二つの方法が考えられる.

5.1 方法1

まず最初の方法は Zhang ら [17, 18, 19] のように A の右から B をかけて $m \times m$ 行列 AB を構成し, m 次元空間の中の Krylov 部分空間 $\langle \boldsymbol{r}_0, AB\boldsymbol{r}_0, \ldots, (AB)^{i-1}\boldsymbol{r}_0 \rangle$ を用いるものである.

ここで, 行列 M に対して $\mathcal{R}(M)$ を M の像空間, $\mathcal{N}(M)$ を M の核空間, 部分空間 V に対して $V^\perp$ を V の直交補空間として以下の準備をする.

補題 1 $\mathcal{R}(A^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(B) \Longrightarrow \mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(AB)$. □

[証明]

$\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(AB)$

$$\Updownarrow$$
$$\{A\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n\} = \{AB\boldsymbol{z} \mid \boldsymbol{z} \in \mathbf{R}^m\}$$
$$\Updownarrow$$
$$\left\{A\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{N}(A)^{\perp}\right\} = \{A\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{R}(B)\}$$
$$\Updownarrow$$
$$\{A\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{R}(A^{\mathrm{T}})\} = \{A\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in \mathcal{R}(B)\}$$
$$\Uparrow$$
$$\mathcal{R}(A^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(B). \quad \blacksquare$$

補題 2 $\mathcal{R}(A^T) = \mathcal{R}(B) \implies \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} ||\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}||_2 = \min_{\boldsymbol{z}\in\mathbf{R}^m} ||\boldsymbol{b} - AB\boldsymbol{z}||_2.$ $\square$

例えば, $\mathrm{rank}A = \mathrm{rank}B = n$ ならば $\mathcal{R}(A^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(B)$ が成り立つ.

そこで $\mathcal{R}(A^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(B)$ を仮定すると, 補題 1 より $\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(AB)$ が成り立ち, 任意の $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbf{R}^n$ に対して $A\boldsymbol{x}_0 = AB\boldsymbol{z}_0$ となるような $\boldsymbol{z}_0 \in \mathbf{R}^m$ が存在し, $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{r}_0 - AB\boldsymbol{z}_0$ となる.

ここで GMRES(k) 法を使って最小二乗問題

$$\min_{\boldsymbol{z}\in\mathbf{R}^m} ||\boldsymbol{b} - AB\boldsymbol{z}||_2 = \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} ||\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}||_2$$

を, 初期近似解 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{z}_0$ を $AB\boldsymbol{z}_0 = A\boldsymbol{x}_0$ となるようにとると, 下記のアルゴリズムを得る.

GMRES(k)-LS 法 1

Choose $\boldsymbol{x}_0$ $(A\boldsymbol{x}_0 = AB\boldsymbol{z}_0)$.

* $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$ $(= \boldsymbol{b} - AB\boldsymbol{z}_0)$

$\boldsymbol{v}_1 = \dfrac{\boldsymbol{r}_0}{||\boldsymbol{r}_0||_2}$

for $i = 1, 2, \ldots, k$ until convergence

$h_{j,i} = (AB\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j) \quad (j = 1, 2, \ldots, i)$

$\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1} = AB\boldsymbol{v}_i - \sum_{j=1}^{i} h_{j,i}\boldsymbol{v}_j$

$h_{i+1,i} = ||\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}||_2$

$\boldsymbol{v}_{i+1} = \dfrac{\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}}{h_{i+1,i}}$

Find $\boldsymbol{y}_i \in \mathbf{R}^i$ which minimizes $||\boldsymbol{r}_i||_2 = ||\ ||\boldsymbol{r}_0||_2\, \boldsymbol{e}_i - \bar{H}_i\, \boldsymbol{y}\, ||_2$

end

$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + B[\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k]\boldsymbol{y}_k \quad (\iff \boldsymbol{z}_k = \boldsymbol{z}_0 + [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k]\boldsymbol{y}_k)$

$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_k \quad (\iff \boldsymbol{z}_0 = \boldsymbol{z}_k)$

Go to $*$.

ところで, 上記のアルゴリズムで GMRES(k) 法の代わりに GMRES 法を用いた方法 ($k=\infty$ の場合) を GMRES-LS 法 1 と呼ぶことにする. この GMRES-LS 法 1 が破綻することなく式 (1) の最小二乗解を与えるための必要十分条件を考える.

まず, 下記の定理 [4, 6] に注意する.

定理 3 $\tilde{A} \in \mathbf{R}^{m\times m}$ に対して下記が成り立つ.

GMRES 法が任意の $\boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^m$ と任意の初期近似解 $\boldsymbol{z}_0 \in \mathbf{R}^m$ に対して $\min_{\boldsymbol{z}\in\mathbf{R}^m} \|\boldsymbol{b} - \tilde{A}\boldsymbol{z}\|_2$ の最小二乗解を与えるための必要十分条件は $\mathcal{N}(\tilde{A}) = \mathcal{N}(\tilde{A}^T)$ である. □

次に下記が成り立つ.

定理 4 $\mathcal{R}(A^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(B)$ ならば,
「$\mathcal{N}(AB) = \mathcal{N}(B^TA^T) \iff \mathcal{R}(B^T) = \mathcal{R}(A)$」が成り立つ. □

[証明]

$$\mathcal{N}(AB) = \mathcal{N}(B^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}})$$
$$\Updownarrow$$
$$AB\boldsymbol{z} = \mathbf{0} \iff B^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z} = \mathbf{0} \quad {}^\forall\boldsymbol{z} \in \mathbf{R}^m$$
$$\Updownarrow$$
$$(*) \quad B\boldsymbol{z} \in \mathcal{N}(A) \iff A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z} \in \mathcal{N}(B^{\mathrm{T}}) \quad {}^\forall\boldsymbol{z} \in \mathbf{R}^m.$$

ここで

$$B\boldsymbol{z} \in \mathcal{R}(B) = \mathcal{R}(A^{\mathrm{T}}) = \mathcal{N}(A)^{\perp},$$
$$A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z} \in \mathcal{R}(A^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(B) = \mathcal{N}(B^{\mathrm{T}})^{\perp}$$

より,

$$(*)$$
$$\Updownarrow$$
$$B\boldsymbol{z} \in \mathcal{N}(A) \cap \mathcal{N}(A)^{\perp} = \{\mathbf{0}\} \iff A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z} \in \mathcal{N}(B^{\mathrm{T}}) \cap \mathcal{N}(B^{\mathrm{T}})^{\perp} = \{\mathbf{0}\} \quad {}^\forall\boldsymbol{z} \in \mathbf{R}^m$$
$$\Updownarrow$$
$$B\boldsymbol{z} = \mathbf{0} \iff A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{z} = \mathbf{0} \quad {}^\forall\boldsymbol{z} \in \mathbf{R}^m$$
$$\Updownarrow$$
$$\mathcal{N}(B) = \mathcal{N}(A^{\mathrm{T}})$$
$$\Updownarrow$$
$$\mathcal{R}(B^{\mathrm{T}})^{\perp} = \mathcal{R}(A)^{\perp}$$
$$\Updownarrow$$
$$\mathcal{R}(B^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(A). \quad \blacksquare$$

従って, 定理 3 で $\tilde{A} = AB$ とおくと, 定理 4 より, 下記を得る.

定理 5 $\mathcal{R}(B) = \mathcal{R}(A^{\mathrm{T}})$ ならば下記が成り立つ.

GMRES-LS 法 1 が任意の $\boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^m$ と任意の $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbf{R}^n$ に対して $\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} ||\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}||_2$ の最小二乗解を与えるための必要十分条件は $\mathcal{R}(B^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(A)$ である. □

ここで, $\mathcal{R}(B^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(A)$ は, B がある正則な行列 C を用いて

$$B = CA^{\mathrm{T}} \tag{4}$$

と表されることと等価である.

ところで, Calvetti ら [5] は GMRES 法を用いて最小二乗問題を解く方法として, 行列 A の右側に $\mathbf{0}$ 列ベクトルを $m-n$ 本付け足して特異行列 $\tilde{A} = [A, 0]$ を構成し, GMRES 法を

$$\min_{\boldsymbol{z}\in\mathbf{R}^m} ||\boldsymbol{b} - \tilde{A}\boldsymbol{z}||_2 \left(= \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} ||\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}||_2\right)$$

に適用させることを提案している.

これは, 上記の GMRES-LS 法 1 において $B = [\mathrm{I}_n, 0]$, $\tilde{A} = AB$ とおくことと等価である. ただし, I_n は $n \times n$ の単位行列である.

従って, $\mathrm{rank}A = n$ ならば $\mathcal{R}(A^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(B)$ は成立するが, $\mathcal{R}(B^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(A)$ は成立するとは限らないので, 彼らの方法は最小二乗解に到達する前に破綻する可能性がある.

5.2 方法 2

もう一つの方法として, 同じ $n \times m$ の写像行列 B を用いて初期残差ベクトル $\boldsymbol{r}_0 \in \mathbf{R}^m$ を $\tilde{\boldsymbol{r}}_0 = B\boldsymbol{r}_0 \in \mathbf{R}^n$ に写像しておいて, n 次元空間内の Krylov 部分空間 $\langle \tilde{\boldsymbol{r}}_0, BA\tilde{\boldsymbol{r}}_0, \ldots, (BA)^{i-1}\tilde{\boldsymbol{r}}_0 \rangle$ を構成し GMRES(k) 法を適用する次の方法も考えられる.

GMRES(k)-LS 法 2

Choose $\boldsymbol{x}_0$.

* $\tilde{\boldsymbol{r}}_0 = B(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0)$

$\boldsymbol{v}_1 = \tilde{\boldsymbol{r}}_0 / ||\tilde{\boldsymbol{r}}_0||_2$

for $i = 1, 2, \ldots, k$ until convergence

$h_{j,i} = (BA\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j) \quad (j = 1, 2, \ldots, i)$

$\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1} = BA\boldsymbol{v}_i - \sum_{j=1}^{i} h_{j,i}\boldsymbol{v}_j$

$h_{i+1,i} = ||\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}||_2$

$\boldsymbol{v}_{i+1} = \hat{\boldsymbol{v}}_{i+1} / h_{i+1,i}$

Find $\boldsymbol{y}_i \in \mathbf{R}^i$ which minimizes $||\boldsymbol{r}_i||_2 = ||\ ||\tilde{\boldsymbol{r}}_0||_2\, \boldsymbol{e}_i - \bar{H}_i\, \boldsymbol{y}\, ||_2$

end

$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k]\boldsymbol{y}_k \quad (\Longleftrightarrow \boldsymbol{z}_k = \boldsymbol{z}_0 + [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k]\boldsymbol{y}_k)$

$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_k \quad (\Longleftrightarrow \boldsymbol{z}_0 = \boldsymbol{z}_k)$
Go to $*$.

この手法は

$$BA\boldsymbol{x} = B\boldsymbol{b} \tag{5}$$

にGMRES(k)法を適用するのと等価である．BA は $n \times n$ 行列なので，$n \leq m$ の場合は，方法1よりも方法2の方が反復当たりの演算量は少なくてすむ．

ここで下記が成り立つ．

定理 6 $BA\boldsymbol{x} = B\boldsymbol{b}$ の解が $\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$ の解であるための必要十分条件は $\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(B^T)$ である． □

[証明]

$\boldsymbol{x}^*$ が $\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$ の最小二乗解である

$\Updownarrow$

$A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x}^* = A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \qquad (2)$

$\Updownarrow$

$A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^* = \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{r}^* = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^*$

$\Updownarrow$

$\langle \boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n \rangle \perp \boldsymbol{r}^*, \quad A = [\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n].$

一方で，

$BA\boldsymbol{x}^* = B\boldsymbol{b}$

$\Updownarrow$

$B\boldsymbol{r}^* = \boldsymbol{0}$

$\Updownarrow$

$\langle \boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n \rangle \perp \boldsymbol{r}^*, \quad B^{\mathrm{T}} = [\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n].$

ここで，

$\langle \boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n \rangle \perp \boldsymbol{r}^* \iff \langle \boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n \rangle \perp \boldsymbol{r}^*$

$\Updownarrow$

$\langle \boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n \rangle = \langle \boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n \rangle$

$\Updownarrow$

$\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(B^{\mathrm{T}}).$ ∎

6　Bの選び方

$\mathcal{R}(B^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(A)$ を充たす以外に, 収束を速めるには, B は $BA \approx \mathrm{I}_n$ を充たすことが望ましい.

Zhang ら [19] は $C = \{\mathrm{diag}(A^{\mathrm{T}}A)\}^{-1}$, $B = CA^{\mathrm{T}}$ とおいて, 彼らの CR-LS(k) 法に適用している. $\boldsymbol{a}_i \neq \boldsymbol{0}$ $(i = 1, \ldots n)$ ならば C は定義でき, 正則である. 従って, $\mathcal{R}(B^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(A)$ をみたす. また, これは正規方程式 $A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x} = A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ に対する $A^{\mathrm{T}}A$ の対角項による行スケーリングに相当する.

6.1　不完全 QR 分解

ここではもう少し複雑な前処理として, $A = QR + E$ で与えられる不完全 QR 分解の適用を検討する. ただし, $Q \in \mathbf{R}^{m\times n}$ は直交行列の近似, $R \in \mathbf{R}^{n\times n}$ は上三角行列, E は誤差行列とする.

従来はこの R を式 (3) の前処理に用いて CG 法を適用していたが, ここでは $B = R^{-1}Q^{\mathrm{T}}$ とおいて, GMRES(k)-LS 方法 1,2 を適用することを考える.

例えば GMRES(k)-LS 法 2 の場合, $R^{-1}Q^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x} = R^{-1}Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ に GMRES(k) 法を適用する. ここで $R^{-1}Q^{\mathrm{T}}A$ は CGLS 法に対する式 (3) の $\tilde{A} = R^{-\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}AR^{-1}$ よりも条件がよいと期待される.

6.2　IMGS(l) 法

不完全 QR 分解の一つとして, 修正 Gram-Schmidt 法 [1] に基づいて行列 Q の現在の列ベクトルを過去の l 本の列ベクトルとのみ直交化させる, 下記の IMGS(l) 法を考える.

$\boldsymbol{a}_i^{(1)} = \boldsymbol{a}_i \quad (i = 1, \ldots, n)$
for $i = 1, 2, \ldots, n$
　$r_{ii} = \|\boldsymbol{a}_i^{(i)}\|_2, \quad \boldsymbol{q}_i = \dfrac{\boldsymbol{a}_i^{(i)}}{r_{ii}}$
　for $j = i+1, \ldots, \min(i+1, n)$
　　$r_{ij} = \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_j^{(i)}$
　　$\boldsymbol{a}_j^{(i+1)} = \boldsymbol{a}_j^{(i)} - r_{ij}\boldsymbol{q}_i$
　end
end

上記の各ステップにおいて, 各 $\boldsymbol{q}_i$ は $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ の線形結合で, $\langle \boldsymbol{q}_1, \ldots, \boldsymbol{q}_n \rangle = \langle \boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n \rangle$ が充たされるので, $\tilde{C}$ を正則な行列として, $Q = A\tilde{C}$ が成り立つ. 従っ

て, $Q^{\mathrm{T}} = \tilde{C}^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}}$ が成り立つ.

また, $r_{ii} \neq 0 \quad (i = 1, \ldots, n)$ より, $R = (r_{ij})$ も正則である.

従って, C を正則な行列として, $B = R^{-1}Q^{\mathrm{T}} = R^{-1}\tilde{C}^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}} = CA^{\mathrm{T}}$ が成り立つ. よって, IMGS(l) 法は定理 5,6 の条件 $\mathcal{R}(B^{\mathrm{T}}) = \mathcal{R}(A)$ を充たす.

ここで, 下記が成り立つ.

補題 7 *IMGS(0)* 法は $B = \{diag(A^{\mathrm{T}}A)\}^{-1}A^{\mathrm{T}}$ とおくことに相当する. □

[証明] IMGS(0) 法は

for $i = 1, 2, \ldots, n$

$r_{ii} = ||\boldsymbol{a}_i||_2, \quad \boldsymbol{q}_i = \dfrac{\boldsymbol{a}_i}{r_{ii}}$

end

で与えられるので,

$$R = \mathrm{diag}(||\boldsymbol{a}_1||_2, \ldots, ||\boldsymbol{a}_n||_2), \quad Q = [\boldsymbol{a}_1/||\boldsymbol{a}_1||_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n/||\boldsymbol{a}_n||_2]$$

が成り立ち,

$$B = R^{-1}Q^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}/||\boldsymbol{a}_1||_2^2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_n^{\mathrm{T}}/||\boldsymbol{a}_n||_2^2 \end{bmatrix}$$

が成り立つ.

一方,

$$\mathrm{diag}(A^{\mathrm{T}}A) = \mathrm{diag}(||\boldsymbol{a}_1||_2^2, \ldots, ||\boldsymbol{a}_n||_2^2)$$

より,

$$\{\mathrm{diag}(A^{\mathrm{T}}A)\}^{-1}A^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^{\mathrm{T}}/||\boldsymbol{a}_1||_2^2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_n^{\mathrm{T}}/||\boldsymbol{a}_n||_2^2 \end{bmatrix}$$

が成り立つ.

従って, $B = R^{-1}Q^{\mathrm{T}} = \{\mathrm{diag}(A^{\mathrm{T}}A)\}^{-1}A^{\mathrm{T}}$ を得る. ∎

7 数値実験

最後に数値実験結果を示す.

最小二乗問題

$$\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n} ||\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}||_2, \quad A \in \mathbf{R}^{m \times n}, \quad (m \geq n)$$

において，テスト行列はMATLABのコマンドsprandnで生成した．その条件数や密度(非零要素の割合)は指定し，非零要素の値は正規分布に従う乱数で発生し，非零要素のパタンも乱数を用いて定めた．

プログラムはMATLAB 6で書き，計算機はNECのPC(1.66GHz, 736MB RAM)を用いた．

用いた行列の大きさは全て$m = 10,000, n = 1,000$で，密度は1.5%で，条件数を表1のように変化させた．

表 1: テスト行列の条件数

Name	条件数
RANDL1	6×10^1
RANDL2	4×10^2
RANDL3	3×10^3
RANDL4	3×10^4
RANDL5	2×10^5
RANDL6	2×10^6
RANDL7	2×10^7

表1の行列Aに対して，真の解を$\boldsymbol{x}^* = (1,\ldots,1)^{\mathrm{T}}$とし，$\boldsymbol{b} = A\boldsymbol{x}^*$とおいて，$\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$を最小化する最小二乗問題を下記(1)–(5)の手法で，相対誤差が$\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^*\|_2/\|\boldsymbol{x}^*\|_2 < 10^{-6}$となるのに要する反復数と計算時間(秒)を比較した． ただし，初期近似解は$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$とした．

(1) CGLS法: 正規方程式$A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x} = A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$をCG法で解く．

(2) 正規方程式にJenningsら[13]によるIMGS法の前処理を施してからCGLS法を適用する．

(3) 正規方程式に提案したIMGS(l)法の前処理を施してからCGLS法を適用する．

(4) IMGS(l)法により$B = R^{-1}Q^{\mathrm{T}}$を求め，GMRES(k)-LS法1を適用する．

(5) IMGS(l)法により$B = R^{-1}Q^{\mathrm{T}}$を求め，GMRES(k)-LS法2を適用する．

ただし，JenningsらのIMGS法における閾値としては$\tau = 1$(正規方程式の行対角スケーリングに相当)が一番(計算時間の上で)速かったが，下記の実験では$\tau = 0.1$とおいた．Saad[15]によるIMGS法も試みたが，Jenningsらの方法よりさらに遅かった．

また，提案したIMGS(l)においても$l = 0$(正規方程式の行対角スケーリングに相当，$B = \mathrm{diag}(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}$)が一番速かったので下記の実験では$l = 0$とおいた．

さらに，GMRES(k)-LS法2において，リスタートの周期kを変化させたところ，表2のようになった．

表 2: GMRES(k)-LS 法 2 でのリスタート周期 k の影響

RANDL2	k	10	50	100	150	250	≥ 262
	iter	559	369	298	306	279	262
	time	35.93	23.65	$*$ 21.69	25.30	30.95	31.75
RANDL3	k	50	100	200	300	500	≥ 574
	iter	1336	988	898	743	652	574
	time	83.20	$*$ 69.67	79.05	83.86	148.94	204.79
RANDL4	k	400	500	600	700	900	≥ 993
	iter	41149	29909	19095	22379	9802	993
	time	7247.13	5525.54	4785.23	6690.14	4113.34	$*$ 1211.83
RANDL5	k	400	500	600	700	900	≥ 998
	iter	46704	25971	28086	23767	9563	998
	time	8170.12	4752.82	6912.20	7739.61	3570.22	$*$ 1228.72

表 2 において, k はリスタート周期, iter, time は各々収束に要する反復数と計算時間を示す. また, $*$ は各問題で一番速かったものを示す.

比較的条件数が小さい問題ではリスタートが有効であるが, 条件数が 10^4 以上の場合は, リスタートなしの GMRES 法を用いた方が収束までの計算時間が短い. そこで, 以下ではリスタートなしの GMRES 法を用いた.

まず, 図 1, 2 に各々RANDL1, RANDL6 に対する各手法の反復数 vs. 相対誤差のグラフを示す.

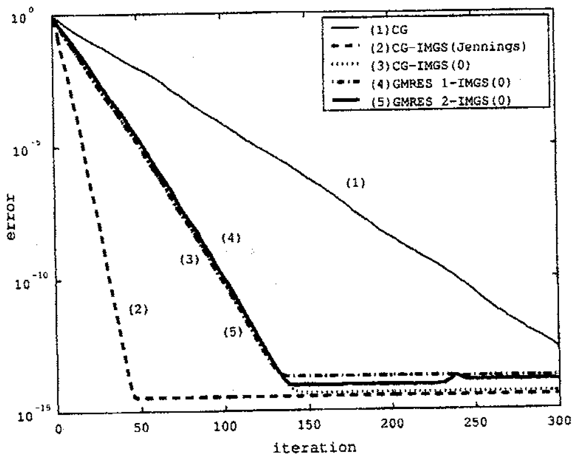

図 1: 反復数 vs. 相対誤差 (RANDL1)

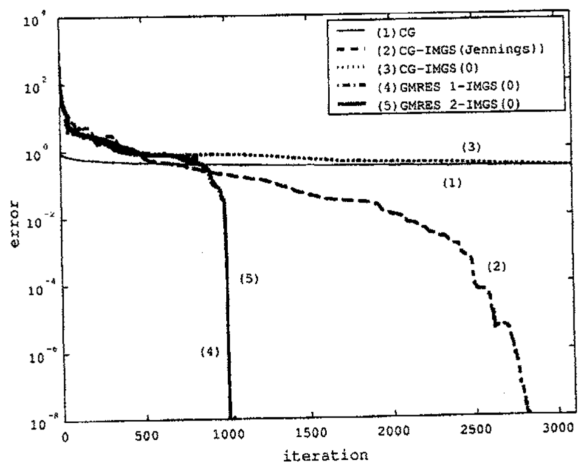

図 2: 反復数 vs. 相対誤差 (RANDL6)

また, 表 3 に表 1 の各問題に対する各手法の比較結果を示す. ただし, † はその反復数

では収束しなかったことを示す.

表 3: 各手法の比較

Matrix	(1)CGLS	(2)CGLS IMGS	(3)CGLS IMGS(0)	(4)GMRES 1 IMGS(0)	(5)GMRES 2 IMGS(0)
RANDL1	146	21	61	61	63
	∗ 1.48	401.04	3.99	14.12	5.06
RANDL2	994	51	270	254	262
	∗ 9.18	535.74	12.83	200.01	31.80
RANDL3	7801	134	737	554	574
	70.71	727.50	∗ 36.17	990.38	204.79
RANDL4	40851	611	4558	991	993
	368.96	1094.75	∗ 218.15	4234.94	1211.83
RANDL5	157470	1101	9954	998	998
	1444.30	1180.55	∗ 478.87	3858.91	1228.72
RANDL6	583250	2733	27129	1000	1000
	5274.50	1841.82	1302.85	4562.32	∗ 1296.03
RANDL7	1000000 †	7018	75995	1000	1060
		2021.13	3645.71	4300.09	∗ 1572.70

以上の実験結果から下記のことが言える.

比較的条件のよい問題では (1) 前処理なしの CGLS 法と (3)IMGS(0) 前処理付きの CGLS 法が一番速かった. (2)Jennings らの IMGS 前処理付きの CGLS 法は反復数は少ないが, 計算時間がかかった. これは, 前処理や前進後退代入の部分の影響と思われる.

条件数が 10^6 以上の問題 RAND L6, L7 では, (1) 前処理なしの CGLS 法は反復数, 計算時間ともかかりすぎたのに対し, (5)IMGS(0) 前処理付きの GMRES-LS 法 2 は最も速く収束した. (5) が (3)IMGS(0) 前処理付きの CGLS 法より速く収束した理由としては, まず, GMRES 法の係数行列 $R^{-1}Q^{\mathrm{T}}A$ の方が CG 法の係数行列 $R^{-1}A^{\mathrm{T}}AR^{-1}$ よりも条件がよいことが考えられる. また, GMRES 法は Gram-Schmidt の直交化を陽に行うのに対し, CG 法は三項漸化式により直交化を行うため, 特に悪条件問題においては GMRES 法よりも CG 法の方が丸め誤差の影響を受けやすいことが考えられる.

(5)GMRES-LS 法 2 の方が (4)GMRES-LS 法 1 より計算時間が少なくてすんだのは, 両者の収束の様子は似ているが, 方法 2 は $n \times n$ 行列 BA に基づく Krylov 部分空間を用いているのに対し, 方法 1 は $m \times m$ 行列 AB に基づく Krylov 部分空間を用いており, 今の場合 $n < m$ の優決定の最小二乗問題を扱っているため, 方法 2 の方が方法 1 よりも反復当たりの計算量が少ないからである.

8 まとめ

GMRES 法を最小二乗問題に適用する方法として, もとの $m \times n$ の係数行列 A に対して, $n \times m$ の写像行列 B を用いて, $AB\boldsymbol{z} = \boldsymbol{b}$ に GMRES 法を適用する方法 1 と, $BA\boldsymbol{x} = B\boldsymbol{b}$ に GMRES 法を適用する方法 2 を提案した.

また, それらの方法が最小二乗解を与えるために写像行列 B が充たすべき条件を導いた. さらに, B の一例として不完全 QR 分解である IMGS(l) 法を提案した.

優決定の最小二乗問題に対する数値実験によると, 悪条件問題では IMGS(0) を用いた GMRES 法 2(正規方程式に行対角スケーリングを施してから GMRES 法を適用することに相当する) は前処理付きの CGLS 法などの従来法よりも速く収束した.

謝辞

本研究に関して有益な示唆をいただいた, 杉原厚吉先生, 張 紹良先生, Yimin Wei 先生に感謝いたします.

参考文献

[1] Björck, A., *Numerical Methods for Least Squares Problems*, SIAM, Philadelphia, 1996.

[2] Bai, Z.-Z., Duff, I.S. and Wathen, A.J., A class of incomplete orthogonal factorization methods. I: Methods and theories, *BIT*, Vol. 41, No. 1, 53–70, 2001.

[3] Benzi, M. and Tuma, M., A robust preconditioner with low memory requirements for large sparse least squares problems, *SIAM J. Sci Comput.*, Vol. 25, 499–512, 2003.

[4] Brown, P.N. and Walker, H. F., GMRES on (nearly) singular systems, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 18, 37–51, 1997.

[5] Calvetti, D., Lewis, B. and Reichel, L., GMRES-type methods for inconsistent systems, *Linear Algebra Appl.*, Vol. 316, 157–169, 2000.

[6] 速水 謙, GMRES and GCR(k) on singular systems, 第 32 回 数値解析シンポジウム 講演予稿集, 71–74, 2003 年 5 月, 箱根.

[7] 伊藤徳史, 速水 謙, GMRES(k) 法の線型最小二乗問題への適用, 日本応用数理学会 2002 年度年会予稿集, http://pjsiam.jstage.jst.go.jp/ja, 2002.

[8] 伊藤 徳史, GMRES 法の線形最小二乗問題への適用, 東京大学 大学院情報理工学系研究科 数理情報学専攻, 修士論文, 2003 年 2 月.

[9] 伊藤徳史, 速水 謙, 不完全 QR-GMRES(k) 法による線形最小二乗問題の解法, 情報処理学会第 65 回全国大会講演論文集, (1-117)–(1-118), 2003.

[10] Ito, T. and Hayami, K., Preconditioned GMRES methods for least squares problems, *NII Technical Report*, National Institute of Informatics, NII-2004-006E, 1–29, May, 2004.

[11] 伊藤 徳史, 速水 謙, 前処理 GMRES 法による最小二乗問題の解法, 2004 年度日本応用数理学会年会 予稿集. 210–211, 2004.

[12] 速水 謙, 伊藤 徳史, GMRES 法を最小二乗問題に適用するための前処理行列が充たすべき性質について, 日本応用数理学会 2004 年度年会 講演予稿集, 212–213, 2004.

[13] Jennings, A. and Ajiz, M.A., Incomplete methods for solving $A^{\mathrm{T}}Ax = b$, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 5, 978–987, 1984.

[14] Meijerink, J.A. and van der Vorst, H., An iterative method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix, *Math. Comp.*, Vol. 31, 148–162, 1977.

[15] Saad, Y., Preconditioning techniques for nonsymmetric and indefinite linear systems, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 24, 89–105, 1988.

[16] Saad, Y. and Schultz, M.H., GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol. 7, 856–869, 1986.

[17] 張 紹良, 共役残差法の一般化, 筑波大学 大学院博士課程 工学研究科 電子情報学専攻 博士論文, 1989.

[18] Zhang, S.-L. and Oyanagi, Y., A necessary and sufficient convergence condition of orthomin(k) methods for least squares problem with weight, *Ann. Inst. Statist. Math.*, Vol. 42, 805–811, 1990.

[19] Zhang, S.-L. and Oyanagi, Y., Orthomin(k) method for linear least squares problem, *J. Inf. Proc.*, Vol. 14, 121–125, 1991.